

CATÁLISIS EN QUÍMICA ORGÁNICA

Curso 2016/2017

(Código: 21151198)

1. PRESENTACIÓN

Los fenómenos catalíticos ocupan un lugar de gran importancia en las distintas especialidades de la Química, tanto en el ámbito de la tecnología como en el de la investigación. Dentro del extenso y diversificado campo de estudio de la catálisis, esta asignatura se dedica al análisis de procesos de este tipo en los que están implicados compuestos orgánicos.

Por ello, está dirigida a estudiantes que pretendan orientar su formación hacia la investigación en Química Orgánica o la industria de síntesis de productos relacionados con esta especialidad. También resultará de utilidad para estudiantes de otras especialidades.

2. CONTEXTUALIZACIÓN

La asignatura "Catálisis en Química Orgánica" pertenece al Master en Ciencia y Tecnología Química, incluido en el Programa Oficial de Posgrado en Química de la UNED. Dentro de dicho Master, está encuadrada en el módulo IV "Química Orgánica".

En el contexto de la Química y en del ámbito de la investigación y la tecnología, la catálisis ocupa un papel de creciente importancia. Durante los estudios de grado y licenciatura, el tema de la catálisis se encuentra distribuido en diferentes asignaturas, por lo que falta tanto su visión de conjunto como el análisis de su proyección hacia una vertiente aplicada.

El tema de la Catálisis abarca un extenso campo que incluye áreas de Química tan diversas como son Química Física, Química Orgánica, Química Inorgánica, Ingeniería Química, Bioquímica, Análisis Químico... Según la vertiente desde la que se pretenda enfocar su investigación, se intensificará el estudio hacia unas u otras de esas áreas. En cualquier caso, puntos clave para el análisis y comprensión de los procesos catalíticos son los principios cinéticos y termodinámicos; el tratamiento de los mecanismos de reacción, de los compuestos de coordinación y de los compuestos organometálicos; el tratamiento de fenómenos de difusión y transporte de calor, etc..

Ante este campo tan amplio y diversificado, ha sido necesario delimitarlo dentro de un marco más concreto, atendiendo a la perspectiva desde la que se realice su enfoque. En este caso ese marco es el de la Química Orgánica. Ello ha sido motivado por el hecho de que gran número de procesos catalíticos corresponde a reacciones de tipo orgánico, por lo que se ha dedicado esta asignatura al estudio más específico de la catálisis orgánica. Asimismo, se ha hecho extensivo a las reacciones bioquímicas, con el tratamiento de la catálisis enzimática. Por otra parte, en la síntesis química los procesos catalíticos tienden a encuadrarse actualmente dentro de la llamada Química Sostenible, lo cual aumenta su interés desde una perspectiva de sostenibilidad medioambiental.

En consecuencia, los contenidos de esta asignatura están muy relacionados y se complementan con los de otras también pertenecientes a este Programa (Química Terapéutica; Química Sostenible. Métodos de Síntesis Orgánica de Bajo Impacto Ambiental; Resolución de Racematos en Estereoisómeros; RMN de Alta Resolución; Química en Superficies y Principios de Catálisis Heterogénea, y Polímeros Técnicos).

3. REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Para poder estudiar esta asignatura es necesario que las/los estudiantes matriculados en la misma:



- Posean conocimientos de Química Orgánica y de Química Física a nivel superior. Por tanto, habrán de proceder de la Licenciatura o del Grado de Química o bien de Titulaciones Superiores con contenidos similares en esos campos.
- Debido a la necesidad de utilizar bibliografía en inglés, es indispensable el conocimiento de dicho idioma a nivel de traducción.

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Una vez cursada esta asignatura, se pretende que el estudiantado alcance los siguientes objetivos:

1.- Conocimiento

- Explicar las bases fundamentales de los fenómenos catalíticos.
- Identificar los diferentes tipos de catálisis.
- Definir, dentro de cada tipo de catálisis, las características y propiedades de los catalizadores correspondientes.
- Reconocer los avances en la investigación sobre catálisis orgánica.

2.- Habilidades y destrezas

- Recopilar bibliografía relativa a la catálisis en procesos orgánicos.
- Interpretar los datos aportados por aquella y las conclusiones correspondientes.
- Planificar procedimientos de síntesis de compuestos orgánicos por procesos catalíticos.

3.- Actitudes

- Seleccionar la información científica más adecuada a la investigación o tema de trabajo que se lleve a cabo.
- Valorar con sentido crítico las ventajas de los procesos catalíticos frente a los no catalíticos.

El logro de estos objetivos supondrán asimismo que se adquieran:

4.- Competencias de carácter transversal

- Capacidad de trabajo autónomo.
- Capacidad para trabajar en equipo.
- Capacidad de búsqueda de información científica.
- Capacidad de análisis, de síntesis y de elaboración de conclusiones.
- Capacidad de organización y planificación.
- Capacidad de planificar y llevar a cabo un plan de investigación.
- Destreza en la comunicación científica.
- Desarrollo de la creatividad y de la generación de ideas.
- Desarrollo del sentido crítico.

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

Se recogen los aspectos más sobresalientes de los procesos catalíticos aplicados a la síntesis de compuestos orgánicos, sin olvidar por ello las bases y el lenguaje generales de la catálisis.

Los contenidos se han desarrollado en doce temas, distribuidos en dos Bloques Temáticos:

Bloque Temático I:



Se estudian los principios básicos de la catálisis y las características de los catalizadores de contacto:

Tema 1.- Bases químico-físicas de la catálisis.

Tema 2.- Catálisis homogénea.

Tema 3.- Catálisis heterogénea.

Tema 4.- Catalizadores sólidos con características ácidas.

Tema 5.- Características texturales de los catalizadores sólidos.

Tema 6.- Preparación y utilización de los catalizadores sólidos.

Bloque Temático II:

Se analizan los tipos de catálisis de mayor incidencia en Química Orgánica, tanto en el campo de la investigación como en el de la aplicación industrial:

Tema 7.- Catálisis por zeolitas.

Tema 8.- Catálisis por complejos de metales de transición.

Tema 9.- Catálisis por complejos metálicos soportados sobre polímeros.

Tema 10.- Catálisis enzimática.

Tema 11.- Catálisis micelar.

Tema 12.- Catálisis por transferencia de fase.

6.EQUIPO DOCENTE

- [ROSA M CLARAMUNT VALLESPI](#)

7.METODOLOGÍA

La metodología es la propia del estudio universitario a distancia. El/la estudiante:

- Contará con un material básico y, además, habrá de consultar las fuentes primarias de bibliografía, según las orientaciones y sugerencias del equipo docente.
- Utilizará Internet a través de la Web UNED. Se dispondrá de una plataforma e-Learning que facilitará la interacción estudiante con el equipo docente y con el resto de estudiantes, y con ello será pieza clave para su tutorización y aprendizaje.

Desde el punto de vista organizativo, se contará con:

Modalidad no presencial:

- Ésta será la modalidad fundamental, por lo que se basará en el trabajo autónomo del estudiante, con la metodología, materiales didácticos y medios arriba apuntados.



Modalidad presencial:

- Habrá una Jornada Presencial, de 10 horas de duración, que se llevará a cabo en la Sede Central, concentrada en un día, para a la realización de un trabajo experimental o asistencia a seminarios. Este trabajo implicará la realización del informe correspondiente.

En función del número de créditos europeos de esta asignatura (6), se ha estimado el tiempo que se ha de dedicar a cada una de las actividades a desarrollar en la misma. Estos tiempos (expresados en número de horas) se recogen en la Tabla siguiente:

TEMAS	Horas totales	TRABAJO AUTÓNOMO		JORNADA PRESENCIAL			INTERACCIÓN EN ENTORNOS VIRTUALES
		Aprendizaje de contenidos con Materiales de Estudio	Pruebas de Evaluación a Distancia	Seminario Presencial	Prácticas Presenciales	Informes de Sesiones Presenciales	Tutoría en línea/ Participación en foros
TEMA 1. Bases químico-físicas de la catálisis.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 2. Catálisis homogénea.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 3. Catálisis heterogénea.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 4. Catalizadores sólidos con características ácidas.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 5. Características texturales de los catalizadores sólidos.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 6. Preparación y utilización de los catalizadores sólidos.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 7.							



Catálisis por zeolitas.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 8. Catálisis por complejos de metales de transición.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 9. Catálisis por complejos metálicos soportados sobre polímeros.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 10. Catálisis enzimática.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 11. Catálisis micelar.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
TEMA 12. Catálisis por transferencia de fase.	12,5	6	4	0,5	0,25	0,25	1,5
Total	150	72	48	6	3	3	18

8. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

- Claramunt, R. M., Esteban, S.: Catálisis en Química Orgánica, material básico sobre los diferentes temas del programa que estará disponible en el curso virtual de la asignatura.
- Rothenberg, G.: Catalysis: Concepts and Green Applications. Wiley, New York, 2008. En la Web: <http://www.catalysisbook.org/>, encontrarán enlaces a presentaciones en powerpoint, problemas y referencias bibliográficas de los contenidos del texto.



9. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

- Astruc, D.: *Química Organometálica*, Reverté, Barcelona, 2003.
- Beller, M., Renken, A., van Santen, R. A. (Editores): *Catalysis: from principles to applications*. Wiley-VCH, Weinheim, 2013.
- Bugg, T. D. H.: *Introduction to Enzyme and Coenzyme Chemistry*, 2ª edición. Blackwell, Oxford, 2004.
- Cabildo, M. P., Cornago, M. P., Escolástico, C., Esteban, S., Farrán, M. A.; Pérez-Torrallba, M., Sanz, D.: *Procesos Orgánicos de Bajo Impacto Ambiental. Química Verde*. UNED, Madrid, 2006.
- Cejka, J., Corma, A., Zones, S (Editores): *Zeolites and Catalysis: synthesis, reactions and applications*, 2 volúmenes. Wiley-VCH, Weinheim, 2010.
- Drauz, K., Waldmann, H.: *Enzyme Catalysis in Organic Synthesis*, 2ª edición, 2 volúmenes. Wiley-VCH, New York, 2002.
- Dugas, H.: *Bioorganic Chemistry: a chemical approach to enzyme action*, 3ª edición. Springer, New York, 1996.
- García-Junceda, E.: *Multi-step enzyme catalysis: biotransformations and chemoenzymatic synthesis*. Verlag-Chemie, Weinheim, 2008.
- Horvath, I. T. (Editor): *Encyclopedia of Catalysis*, 6 volúmenes. Wiley, New York, 2003.
- Khan, M. N.: *Micellar Catalysis*. Taylor and Francis, Boca Ratón, 2007.
- Li, C., Liu, Y. (Editores): *Bridging Heterogeneous and Homogeneous Catalysis: concepts, strategies and applications*. Wiley-VCH, Weinheim, 2014.
- Maruoka, K. (Editor). *Asymmetric Phase Transfer Catalysis*. Wiley, New York, 2008.



- Sasson, Y., Neumann, R. *Handbook of Phase transfer Catalysis*. Blackie Academic and Professional, London, 1997.
- Sheldon, R. A., Arends, I., Hanefeld, U.: *Green Chemistry and Catalysis*. Wiley-VCH, Weinheim, 2007.
- Smith, M. B. : *March's Advanced Organic Chemistry: reactions, mechanisms and structure* 7a edición. Wiley, New York, 2013.
- van Santen, R. A., van Leeuwen, P. W. N. M., Moulijn, J. A., Averill, B. A. (Editores): *Catalysis: an integrated approach*, 2ª edición. Elsevier, New York, 2000.
- van Leeuwen, P. W. N. M.: *Homogeneous Catalysis*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2004.
- Wong, CH.-H., Whitesides, G. M.: *Enzymes in Synthetic Organic Chemistry*. Elsevier, Oxford, 1994.
- Yamamoto, H., Ishihara, K. (Editores): *Acid Catalysis in Modern Organic Synthesis*, 2 volúmenes. Wiley-VCH, Weinheim, 2008.

10. RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

Un recurso importante con el que se contará es:

- Una plataforma e-Learning a través de la página web de la UNED, que proporciona el interfaz adecuado de interacción estudiante-equipo docente y estudiante-estudiante.

Se trata de una pieza clave para la tutorización y el aprendizaje.

11. TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

La tutorización de esta asignatura se llevará a cabo por la profesora:

Dra. D^a Rosa M^a Claramunt Vallespí
 Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica – Facultad de Ciencias – UNED
 C/ Senda del Rey, 9 28040 - Madrid

Despacho 302
 Tfno. 91 3987322
 e mail: rclaramunt@ccia.uned.es



12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

1.- Se llevará a cabo una *evaluación continua* de esta asignatura, a través de:

Realización de Pruebas de Evaluación a Distancia de dos clases: a) de comprensión de contenidos del programa y b) de análisis y desarrollo de temas bibliográficos referentes a investigaciones actuales en el área.

La *Primera y la Segunda Prueba* consistirán en la respuesta a una serie de cuestiones de respuesta de desarrollo, pero que se deben contestar de manera clara, breve y concisa.

La *Tercera Prueba* exige llevar a cabo un análisis crítico de un artículo científico perteneciente a la bibliografía sobre catálisis, cuya copia adjuntará oportunamente el equipo docente. El/la estudiante explicará por escrito sobre qué versa el trabajo, su fundamento teórico, la importancia de los resultados experimentales, la metodología y técnicas utilizadas para la resolución de los diferentes problemas planteados a lo largo de su desarrollo y cuáles son sus aportaciones más relevantes en el área de la Química Orgánica.

Asistencia a una Jornada Presencial, sesión única de 10 horas, en la Sede Central.

2.- En cuanto a la *valoración* de cada una de estas actividades, se tendrá en cuenta lo siguiente:

- En la Primera y Segunda Prueba de Evaluación: la corrección de la respuesta, el razonamiento dado a la misma y la forma de exponerlo.
- En la Tercera Prueba de Evaluación: la capacidad de análisis y de síntesis, las conclusiones extraídas de la lectura del artículo científico sobre el que versa esta Prueba y el sentido crítico que se desprende de todo ello.
- En la Jornada Presencial de prácticas: trabajo y elaboración del informe correspondiente.
- En todas las Pruebas, se valorará la redacción y presentación de las mismas.

3.- La *calificación final* será el resultado de la siguiente ponderación de cada una de las actividades de evaluación:

- Pruebas de Evaluación a Distancia: contribuirán en un 90%.

Es de carácter obligatorio la entrega de todas las PEDs; la calificación obtenida en cada una de ellas no podrá ser inferior a 4,0 (sobre 10) y además, para superar la asignatura, será necesario tener como mínimo una media de 5.0 entre las 3 PECs.

- Jornada Presencial y elaboración del informe: 10%.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

